レッスン 4　同値分解と LDU 分解　 Part I 導出

このレッスンでは同値分解とその一種である LDU 分解の導出をまとめて行う。次のレッスンで示すように、これらの分解定理は、行列の階数、逆行列、ベクトル空間の基底、次元、行列方程式、などに関する基本的事実の導出用のエンジンとして機能する。とくに、LDU 分解は行列方程式の数値解法としての価値が高い（実際には前処理つきの LU 分解として使うことが多い)。導出法は「行および列交換付きガウスの消去法」による。導出に必要となる行演算／列演算については、レッスン 1、腕試し問題 1.2 – 1.7 を復習して頂きたい。

4.1　同値分解

次の分解を同値分解 equivalence decomposition という（注意 : この呼び名は標準的ではない、同値な行列 equivalent matrices という標準的ないい方からの流用である）:

任意の $\mathbf{0} \neq \mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m\times n}$ はつねに

(1)　$\mathbf{A} = \mathbf{P}\begin{bmatrix} \mathbf{I}_r & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}\mathbf{Q} \equiv \mathbf{PDQ}$,

の形に分解可能である。ここに

(2)　$\mathbf{I}_r = r$ 次単位行列$=\begin{bmatrix} 1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & 1 \end{bmatrix}$（1 の個数は r 個、　$1 \leq r \leq \min\{m,n\}$）、

$\mathbf{P} \in \mathbf{R}^{m\times m}, \mathbf{Q} \in \mathbf{R}^{n\times n}$ はそれぞれ適当な m 次、n 次の可逆行列を表す。(1)式中の $\mathbf{D}$ は $\mathbf{P}, \mathbf{Q}$ の選び方に無関係に $\mathbf{A}$ のみによって一意的に定まる行列を表し、標準形 canonical form と呼ばれる。したがって r も $\mathbf{A}$ のみによって定まり、$\mathbf{A}$ の階数 rank と呼ばれる。また、$\mathbf{A} \in \mathbf{C}^{m\times n}$ の場合は $\mathbf{P} \in \mathbf{C}^{m\times m}$ 、$\mathbf{Q} \in \mathbf{C}^{n\times n}$ となる。

線形変換 $\mathbf{y} = \mathbf{Ax}$ に対して座標変換 $\mathbf{y} = \mathbf{P}^{-1}\tilde{\mathbf{y}}, \ \mathbf{x} = \mathbf{Q}\tilde{\mathbf{x}}$ を行うと、$\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{PAQ}\tilde{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_r & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}\tilde{\mathbf{x}}$ となる。すなわち、問題の線形変換を新座標系から見ると、標準形$\begin{bmatrix} \mathbf{I}_r & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}$に見えるというわけである。次節において示すように、同値分解は LDU 分解から簡単に従う。

4.2　LDU 分解

次の分解を LDU 分解 LDU decomposition という : 任意の $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m\times n}$（$\mathbf{A} \neq \mathbf{0}$）に対して m

次順列行列 $\mathbf{P}$ 、n 次順列行列 $\mathbf{Q}$ を適当に取れば（順列行列とは単位行列の行または列を並び替えたもの）、$\mathbf{PAQ}$ は

$$(1)\quad \mathbf{PAQ}=\begin{bmatrix}\mathbf{L}_{11} & \mathbf{0}\\ \mathbf{L}_{21} & \mathbf{I}_{m-r}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{D}_r & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0}_{(m-r)\times(n-r)}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{U}_{11} & \mathbf{U}_{12}\\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_{n-r}\end{bmatrix}\equiv\mathbf{LDU}$$

の形に一意的に分解できる（同じ記号 $\mathbf{P},\mathbf{Q}$ が前節とは異なる意味で使われていることに注意）。ここに、r は $\mathbf{A}$ の階数を表し、$\mathbf{L}_{11},\mathbf{D}_r,\mathbf{U}_{11}$ は次の形の r 次可逆行列を表す：

$$\mathbf{L}_{11}=\begin{bmatrix}1 & & & \mathbf{O}\\ x & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ x & \cdots & x & 1\end{bmatrix}、\mathbf{D}_r=\begin{bmatrix}d_1 & & \mathbf{O}\\ & \ddots & \\ \mathbf{O} & & d_r\end{bmatrix}\ (d_1,\cdots,d_r\neq 0)、\mathbf{U}_{11}=\begin{bmatrix}1 & x & \cdots & x\\ & 1 & x\cdots & x\\ & & \ddots & \\ \mathbf{O} & & & 1\end{bmatrix}$$

$\mathbf{L},\mathbf{U}$ の対角成分はすべて1であるから、いずれも可逆行列を表す。$\mathbf{PAQ}$ は $\mathbf{A}$ の行と列に適当な並べ替えを施した行列を表す。$\mathbf{A}$ が複素行列なら $\mathbf{L},\mathbf{D},\mathbf{U}$ も一般に複素行列となる。

導出は後述する。(1)式を

$$(2)\quad \mathbf{PAQ}=(\mathbf{L}\begin{bmatrix}\mathbf{D}_r & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{I}\end{bmatrix})\begin{bmatrix}\mathbf{I}_r & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0}\end{bmatrix}\mathbf{U}\quad または\quad \mathbf{PAQ}=\mathbf{L}\begin{bmatrix}\mathbf{I}_r & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0}\end{bmatrix}(\begin{bmatrix}\mathbf{D}_r & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{I}\end{bmatrix}\mathbf{U})$$

と書き直すと、これは $\mathbf{PAQ}$ の同値分解となっている。また、(1)を $\mathbf{A}$ について解くと

$$(3)\quad \mathbf{A}=(\mathbf{P}^T\mathbf{L})\begin{bmatrix}\mathbf{I}_r & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0}\end{bmatrix}(\begin{bmatrix}\mathbf{D}_r & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{I}\end{bmatrix}\mathbf{UQ}^T)\quad （\mathbf{P}^T=\mathbf{P}^{-1},\ \mathbf{Q}^T=\mathbf{Q}^{-1}\ に注意）$$

これは $\mathbf{A}$ の同値分解となっている。ゆえに、r は $\mathbf{A}$ の階数を表すことは明らかである。

また、(1)式を

$$(4)\quad \mathbf{PAQ}=\mathbf{L}(\mathbf{DU})=(\mathbf{LU})\mathbf{U}$$

型に書いたものを $\mathbf{PAQ}$ の <u>LU 分解</u>という。

4.3　ガウスの消去法による LDU 分解 Part I

3×4 行列

$$(1)\quad \mathbf{A}=\begin{bmatrix}a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14}\\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24}\\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34}\end{bmatrix}\neq\mathbf{0}$$

を例にとって同値分解と LDU 分解の導出法を説明しよう。

まずは必要な行演算の説明から行う。3 次単位行列の第 1 行の l_{i1} 倍を第 i 行から引くと

（$i=2,3$）

(2)　$\mathbf{L}_1=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ -l_{21} & 1 & 0\\ -l_{31} & 0 & 1\end{bmatrix}$

これを与えられた行列に左から掛けると同じことが起こる。すなわち、$\mathbf{A}$ の第 1 行の l_{i1} 倍が第 i 行から引かれる（$i=2,3$）:

(3)　$\mathbf{L}_1\mathbf{A}=\begin{bmatrix}a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14}\\ a_{21}-l_{21}a_{11} & a_{22}-l_{21}a_{12} & a_{23}-l_{21}a_{13} & a_{24}-l_{21}a_{14}\\ a_{31}-l_{31}a_{11} & a_{32}-l_{31}a_{12} & a_{33}-l_{31}a_{13} & a_{34}-l_{31}a_{14}\end{bmatrix}$

ここで

(4)　$a_{11}\neq 0$

なら、(3)式の右辺第 1 列の第 2 行目以下をゼロ化するように l_{i1} を選ぶことが可能である：すなわち、

(5)　$l_{i1}=a_{i1}/a_{11}\,(i=2,3)$

をとれば

(6)　$\mathbf{L}_1\mathbf{A}=\begin{bmatrix}a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14}\\ 0 & a_{22}-l_{21}a_{12} & a_{23}-l_{21}a_{13} & a_{24}-l_{21}a_{14}\\ 0 & a_{32}-l_{31}a_{12} & a_{33}-l_{31}a_{13} & a_{34}-l_{31}a_{14}\end{bmatrix}$

$$\equiv\begin{bmatrix}a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14}\\ 0 & a^{(1)}{}_{22} & a^{(1)}{}_{23} & a^{(1)}{}_{24}\\ 0 & a^{(1)}{}_{32} & a^{(1)}{}_{33} & a^{(1)}{}_{34}\end{bmatrix}$$

すなわち、(6)式は「第 1 行を<u>軸 </u>pivot としてそれ以下の行の先頭成分（＝(2,1),(3,1)成分）を消去する」演算を表す。この場合(1,1)成分を<u>軸成分 </u>pivotal component という。

ここで第(2,2)成分が非零なら、すなわち

(7)　$a^{(1)}{}_{22}=a_{22}-l_{21}a_{12}\neq 0$

なら、上と同じ考えで第 2 行を軸として(3,2)成分を消去する。すなわち、

(8)　$\mathbf{L}_2=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & -l_{32} & 1\end{bmatrix}$、　$l_{32}=a^{(1)}{}_{32}/a^{(1)}{}_{22}\quad(a^{(1)}{}_{22}\neq 0)$

を $\mathbf{L}_1\mathbf{A}$ に左から掛けて(3,2)成分を消去する：

(9)　$$\mathbf{L}_2(\mathbf{L}_1\mathbf{A}) = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a^{(1)}{}_{22} & a^{(1)}{}_{23} & a^{(1)}{}_{24} \\ 0 & 0 & a^{(1)}{}_{33} - l_{32}a^{(1)}{}_{23} & a^{(1)}{}_{34} - l_{31}a_{14} \end{bmatrix}$$

$$\equiv \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a^{(1)}{}_{22} & a^{(1)}{}_{23} & a^{(1)}{}_{24} \\ 0 & 0 & a^{(2)}{}_{33} & a^{(2)}{}_{34} \end{bmatrix}$$

この場合第 1 列のゼロ成分が非零成分に転じることはない。ここで

(10)　$a^{(2)}{}_{33} \neq 0$

なら、

(11)　$$\mathbf{L}_1{}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix}、\quad \mathbf{L}_2{}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & l_{32} & 1 \end{bmatrix}$$

を利用して、(9)式より

(12)　$$\mathbf{A} = \mathbf{L}_1{}^{-1}\mathbf{L}_2{}^{-1} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a^{(1)}{}_{22} & a^{(1)}{}_{23} & a^{(1)}{}_{24} \\ 0 & 0 & a^{(2)}{}_{33} & a^{(2)}{}_{34} \end{bmatrix}$$

$$= \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a^{(1)}{}_{22} & a^{(1)}{}_{23} & a^{(1)}{}_{24} \\ 0 & 0 & a^{(2)}{}_{33} & a^{(2)}{}_{34} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a^{(1)}{}_{22} & a^{(1)}{}_{23} & a^{(1)}{}_{24} \\ 0 & 0 & a^{(2)}{}_{33} & a^{(2)}{}_{34} \end{bmatrix} \quad \text{(LU 分解形)}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a^{(1)}{}_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a^{(2)}{}_{33} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & a_{12}/a_{11} & a_{13}/a_{11} & a_{14}/a_{11} \\ 0 & 1 & a^{(1)}{}_{23}/a^{(1)}{}_{22} & a^{(1)}{}_{24}/a^{(1)}{}_{22} \\ 0 & 0 & 1 & a^{(2)}{}_{34}/a^{(2)}{}_{33} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$\equiv \mathbf{LDU}$（$a_{11} \neq 0$、$a^{(1)}{}_{22} \neq 0$、$a^{(2)}{}_{33} \neq 0$ に注意）

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a^{(1)}{}_{22} & a^{(1)}{}_{23} & a^{(1)}{}_{24} \\ 0 & 0 & a^{(2)}{}_{33} & a^{(2)}{}_{34} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \text{（同値分解形）}$$

与えられた $\mathbf{A}$ からここに至るまでの過程をまとめてガウスの消去法 Gaussian elimination と呼んでいる。いい換えれば、同値分解／LDU 分解はこの手続きの行列算による表現に他ならない。ただ、これが可能であるためには「軸成分 $\neq 0$」の仮定(4)(7)(10)が成立すること、すなわち、ガウスの消去法実行途上において 0 による割り算が発生しないこと、が保証される必要がある。一般にはこの保証はないから、行または列（または両方）の入れ替えによりつねに非零軸成分が得られるような工夫を行う必要がある。この仕組みを組み込んだのが「行および列交換付きガウスの消去法」であり、これを行列算によって表現したのが LDU 分解に他ならない。節を改めて説明しよう。

4.4　ガウスの消去法による LDU 分解 Part II

前節と同じく、3 x 4 行列

(1)
$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{bmatrix} \neq \mathbf{0}$$

を例にとって、行／列交換付きガウスの消去法による LDU 分解の構築法を示す。

まず、$\mathbf{A} \neq \mathbf{0}$ の仮定より、その成分の中から非零成分を一つ選ぶ（例：絶対値最大のものを一つ選ぶ）。その成分を行の入れ替えまたは列の入れ替え（または両者の併用）により(1,1)の位置に移動させる。これは適当な 3 次順列行列 $\mathbf{P}_1$ と適当な 4 次順列行列 $\mathbf{Q}_1$ を $\mathbf{A}$ に左右から乗じて実現できる。何もする必要のないときは $\mathbf{P}_1 = \mathbf{I}$ 、$\mathbf{Q}_1 = \mathbf{I}$ と考えればよい。実行結果は

(2)
$$\mathbf{P}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1 = \begin{bmatrix} a_{11}' & a_{12}' & a_{13}' & a_{14}' \\ a_{21}' & a_{22}' & a_{23}' & a_{24}' \\ a_{31}' & a_{32}' & a_{33}' & a_{34}' \end{bmatrix}, a_{11}' \neq 0$$

ここでは $a_{11}' \neq 0$ が成立しているから、前節と同じ手続きに従って第 1 行を軸行として

(2,1)(3,1)成分を消去する。すなわち、

(3)
$$\mathbf{L}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -l_{21} & 1 & 0 \\ -l_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix} \text{、} l_{i1} = a_{i1}' / a_{11}' \ (i = 2,3)$$

をとれば

(4) $$\mathbf{L}_1\mathbf{P}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1=\begin{bmatrix} a_{11}' & a_{12}' & a_{13}' & a_{14}' \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & a_{24}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & a_{34}^{(1)} \end{bmatrix}\ (a_{11}'\neq 0)$$

(5) $$a_{ij}^{(1)}=a_{ij}'-l_{i1}a_{1j}'\quad (i=2,3,\ j=2,3,4)$$

となる。

ここで「右下 2 x 3 小行列＝$\mathbf{0}$」なら、すなわち、

(6) $$\mathbf{L}_1\mathbf{P}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1=\begin{bmatrix} a_{11}' & a_{12}' & a_{13}' & a_{14}' \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}\ (a_{11}'\neq 0)$$

なら、これを

(7) $$\mathbf{P}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1=\mathbf{L}_1^{-1}\begin{bmatrix} a_{11}' & a_{12}' & a_{13}' & a_{14}' \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_{11}' & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & a_{12}'/a_{11}' & a_{13}'/a_{11}' & a_{14}'/a_{11}' \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\ (a_{11}'\neq 0)$$

と書き直せば LDU 分解が得られる。

そこで、(4)式中の「右下 2 x 3 小行列≠$\mathbf{0}$」の場合、すなわち

(8) $$\begin{bmatrix} a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & a_{24}^{(1)} \\ a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & a_{34}^{(1)} \end{bmatrix}\neq\mathbf{0}$$

の場合を考えよう。非零成分を一つ選び（例：絶対値最大成分を一つ選ぶ)、行／列の入れ替えにより、これを(4)式 3 x 4 行列の(2,2)の位置に移動させる。結果を

(9) $$\mathbf{P}_2(\mathbf{L}_1\mathbf{P}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1)\mathbf{Q}_2=\begin{bmatrix} a_{11}' & a_{12}' & a_{13}' & a_{14}' \\ 0 & a_{22}^{(1)'} & a_{23}^{(1)'} & a_{24}^{(1)'} \\ 0 & a_{32}^{(1)'} & a_{33}^{(1)'} & a_{34}^{(1)'} \end{bmatrix}\ (a_{11}'\neq 0, a_{22}^{(1)'}\neq 0)$$

と書こう。ここに $\mathbf{P}_2$ は 2 行目以下の行交換を表す 3 次順列行列、$\mathbf{Q}_2$ は 2 列目以下の列交換を表す 4 次順列行列であり、それぞれの形は

(10)　$\mathbf{P}_2 = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{P}_2' \end{bmatrix}$（$\mathbf{P}_2^{'}$ は 2 次順列行列）、　$\mathbf{Q}_2 = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{Q}_2' \end{bmatrix}$（$\mathbf{Q}_2^{'}$ は 3 次順列行）

で与えられる（この際、第 1 列中のゼロ成分は見かけ上不変である）。次に第 2 行を軸行として (3,2)成分を消去する。これは次の演算で実現される：

(11)　$\mathbf{L}_2(\mathbf{P}_2\mathbf{L}_1\mathbf{P}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2) = \begin{bmatrix} a_{11}^{'} & a_{12}^{'} & a_{13}^{'} & a_{14}^{'} \\ 0 & a_{22}^{(1)'} & a_{23}^{(1)'} & a_{24}^{(1)'} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & a_{34}^{(2)} \end{bmatrix} \ (a_{11}^{'} \neq 0, a_{22}^{(1)'} \neq 0)$

ここに

(12)　$\mathbf{L}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -l_{32} & 1 \end{bmatrix}$、$l_{32} = a_{32}^{(1)'} / a_{22}^{(1)'}$、$a_{3j}^{(2)} = a_{3j}^{(1)'} - l_{32}a_{2j}^{(1)'}$，$j = 3,4$

ここで「(11)式の行列右下 1 x 2 小行列＝$\mathbf{0}$」なら、すなわち

(13)　$\begin{bmatrix} a_{33}^{(2)} & a_{34}^{(2)} \end{bmatrix} = \mathbf{0}$

なら、(11)式は

(14)　$\mathbf{L}_2(\mathbf{P}_2\mathbf{L}_1\mathbf{P}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2) = \begin{bmatrix} a_{11}^{'} & a_{12}^{'} & a_{13}^{'} & a_{14}^{'} \\ 0 & a_{22}^{(1)'} & a_{23}^{(1)'} & a_{24}^{(1)'} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \ (a_{11}^{'} \neq 0, a_{22}^{(1)'} \neq 0)$

となる。ここで左辺を次のように書きなおす（この変形がポイント！）：

(15)　$\mathbf{L}_2\mathbf{P}_2\mathbf{L}_1\mathbf{P}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2 = \mathbf{L}_2(\mathbf{P}_2\mathbf{L}_1\mathbf{P}_2^{T})(\mathbf{P}_2\mathbf{P}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2)$　$(\because \mathbf{P}_2^{T}\mathbf{P}_2 = \mathbf{I})$

ここで $\mathbf{P}_2$ の形の特殊性により、$\mathbf{P}_2\mathbf{L}_1\mathbf{P}_2^{T} \equiv \mathbf{L}_1^{'}$ は $\mathbf{L}_1$ と同形となる：

(16)　$\mathbf{L}_1^{'} = \mathbf{P}_2\mathbf{L}_1\mathbf{P}_2^{T} = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{P}_2' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -l_{21} & 1 & 0 \\ -l_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{P}_2' \end{bmatrix}^{T} = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{P}_2^{'}\begin{bmatrix} -l_{21} \\ -l_{31} \end{bmatrix} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -l_{21}^{'} & 1 & 0 \\ -l_{31}^{'} & 0 & 1 \end{bmatrix}$

これを見ると（$\begin{bmatrix} -l_{21} \\ -l_{31} \end{bmatrix} \to \mathbf{P}_2^{'}\begin{bmatrix} -l_{21} \\ -l_{31} \end{bmatrix}$ に注意)、各乗数は特定の行に付随しその行が動けばその乗数もついて動く、ことがわかる。(15)を書き直すと

(17)　$\mathbf{L}_2(\mathbf{P}_2\mathbf{L}_1\mathbf{P}_2^{T})(\mathbf{P}_2\mathbf{P}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2) = \mathbf{L}_2\mathbf{L}_1^{'}(\mathbf{P}_2\mathbf{P}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2)$

これを(14)式に使うと

(18)　$$\mathbf{L}_2\mathbf{L}_1^{'}(\mathbf{P}_2\mathbf{P}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2)=\begin{bmatrix} a_{11}^{'} & a_{12}^{'} & a_{13}^{'} & a_{14}^{'} \\ 0 & a_{22}^{(1)'} & a_{23}^{(1)'} & a_{24}^{(1)'} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \ (a_{11}^{'}\neq 0, a_{22}^{(1)'}\neq 0)$$

これより

(19)　$$\mathbf{P}_2\mathbf{P}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2=(\mathbf{L}_1^{'})^{-1}\mathbf{L}_2^{-1}\begin{bmatrix} a_{11}^{'} & a_{12}^{'} & a_{13}^{'} & a_{14}^{'} \\ 0 & a_{22}^{(1)'} & a_{23}^{(1)'} & a_{24}^{(1)'} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21}^{'} & 1 & 0 \\ l_{31}^{'} & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & l_{32} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_{11}^{'} & a_{12}^{'} & a_{13}^{'} & a_{14}^{'} \\ 0 & a_{22}^{(1)'} & a_{23}^{(1)'} & a_{24}^{(1)'} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21}^{'} & 1 & 0 \\ l_{31}^{'} & l_{32} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_{11}^{'} & a_{12}^{'} & a_{13}^{'} & a_{14}^{'} \\ 0 & a_{22}^{(1)'} & a_{23}^{(1)'} & a_{24}^{(1)'} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21}^{'} & 1 & 0 \\ l_{31}^{'} & l_{32} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_{11}^{'} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a^{(1)}{}_{22}^{'} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & a_{12}^{'}/a_{11}^{'} & a_{13}^{'}/a_{11}^{'} & a_{14}^{'}/a_{11}^{'} \\ 0 & 1 & a_{23}^{(1)'}/a_{22}^{(1)'} & a_{24}^{(1)'}/a_{22}^{(1)'} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\equiv \mathbf{LDU} \quad (a_{11}^{'}\neq 0, a_{22}^{(1)'}\neq 0)$$

となって目指す LDU 分解が得られる。

　最後の場合として、「(11)式右下 1 x 2 小行列$\neq \mathbf{0}$」の場合

(20)　$$\begin{bmatrix} a_{33}^{(2)} & a_{34}^{(2)} \end{bmatrix}\neq \mathbf{0}$$

の場合、を考えなければならない。この場合は$a_{33}^{(2)}, a_{34}^{(2)}$の中から非零成分を選び、必要があれば最後の 2 列を入れ替えて、それを(3,3)の位置にもってくる。この作業は適当な順列行列$\mathbf{Q}_3$をとって上の行列に右から乗ずればよい：

$$(21)\quad \mathbf{L}_2\mathbf{P}_2\mathbf{L}_1\mathbf{P}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2\mathbf{Q}_3 = \begin{bmatrix} a_{11}' & a_{12}' & a_{13}'' & a_{14}'' \\ 0 & a_{22}^{(1)'} & a_{23}^{(1)''} & a_{24}^{(1)''} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)'} & a_{34}^{(2)'} \end{bmatrix} \ (a_{11}' \neq 0,\ a_{22}^{(1)'} \neq 0,\ a_{33}^{(2)'} \neq 0)$$

ここに$\mathbf{Q}_3$の構造は

$$(22)\quad \mathbf{Q}_3 = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{Q}_3' \end{bmatrix}$$（$\mathbf{Q}_3'$は適当な２次順列行列）

(21)の左辺を$\mathbf{L}_2(\mathbf{P}_2\mathbf{L}_1\mathbf{P}_2^T)\mathbf{P}_2\mathbf{P}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2\mathbf{Q}_3$と変形し、$\mathbf{P}_2\mathbf{L}_1\mathbf{P}_2^T = \mathbf{L}_1'$を想起すれば、(21)より

$$(23)\quad (\mathbf{P}_2\mathbf{P}_1)\mathbf{A}(\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2\mathbf{Q}_3) = (\mathbf{L}_1')^{-1}\mathbf{L}_2^{-1} \begin{bmatrix} a_{11}' & a_{12}' & a_{13}'' & a_{14}'' \\ 0 & a_{22}^{(1)'} & a_{23}^{(1)''} & a_{24}^{(1)''} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)'} & a_{34}^{(2)'} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21}' & 1 & 0 \\ l_{31}' & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11}' & a_{12}' & a_{13}'' & a_{14}'' \\ 0 & a_{22}^{(1)'} & a_{23}^{(1)''} & a_{24}^{(1)''} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)'} & a_{34}^{(2)'} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21}' & 1 & 0 \\ l_{31}' & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11}' & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{22}^{(1)'} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)'} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & a_{12}'/a_{11}' & a_{13}''/a_{11}' & a_{14}''/a_{11}' \\ 0 & 1 & a_{23}^{(1)''}/a_{22}^{(1)'} & a_{24}^{(1)''}/a_{22}^{(1)'} \\ 0 & 0 & 1 & a_{34}^{(2)'}/a_{33}^{(2)'} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\equiv \mathbf{LDU}\ (a_{11}' \neq 0,\ a_{22}^{(1)'} \neq 0,\ a_{33}^{(2)'} \neq 0)$$

が得られる。これは$(\mathbf{P}_2\mathbf{P}_1)\mathbf{A}(\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2\mathbf{Q}_3) \equiv \mathbf{PAQ}$の LDU 分解を表す。以上の方法の一般の場合への拡張は練習問題としてラーナーにお任せする。■

以上の考察から、以上の算法をコンピュータ上に実装するには、次のようにすればよいことを確認されよ：与えられた行列$\mathbf{A}$を記憶する配列と、行った行交換、列交換を記録するための２つの配列$(1,2,3)$および$(1,2,3,4)$を用意し、消去演算によって更新された成分は元の成分の上に上書きし、乗数（$l_{21},\cdots$）は対応するゼロ化された位置に上書きする（例：l_{21}は(2,1)の位置に上書きする)。行交換を行うときは行全体に対して行い（行の左一部には乗数が入っている)、行および列交換を管理する配列を更新する。念のため最初の２，３ステップを示すと（記号はこれまで使ったものを使う)：

$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{bmatrix}(\neq \mathbf{0})$ （$\mathbf{A}$ の初期値）

$\rightarrow \begin{bmatrix} a_{11}' & a_{12}' & a_{13}' & a_{14}' \\ a_{21}' & a_{22}' & a_{23}' & a_{24}' \\ a_{31}' & a_{32}' & a_{33}' & a_{34}' \end{bmatrix}$($a_{11}' \neq 0$) ：$\mathbf{P}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1$ を計算し、$\mathbf{A}$ 上に上書きし、配列 $(1,2,3)$ 、

$(1,2,3,4)$ を更新する(例：1 行と 3 行が交換され、２列と 4 列が交換されたなら

$(1,2,3) \rightarrow (3,2,1)$ 、$(1,2,3,4) \rightarrow (1,4,3,2)$ となる）

$\rightarrow \begin{bmatrix} a_{11}' & a_{12}' & a_{13}' & a_{14}' \\ l_{21} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & a_{24}^{(1)} \\ l_{31} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & a_{34}^{(1)} \end{bmatrix}$ $(a_{11}' \neq 0)$ ：$\mathbf{L}_1\mathbf{P}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1$ を計算し、$\mathbf{A}$ 上に上書きし、第 1 列のゼロ化された位置に乗数 l_{21}, l_{31} を上書きする。

$\rightarrow \begin{bmatrix} a_{11}' & a_{12}' & a_{13}' & a_{14}' \\ l_{21}' & a_{22}^{(1)'} & a_{23}^{(1)'} & a_{24}^{(1)'} \\ l_{31}' & a_{32}^{(1)'} & a_{33}^{(1)'} & a_{34}^{(1)'} \end{bmatrix}$ $(a_{11}' \neq 0, a_{22}^{(1)'} \neq 0)$ ：上の行列に行交換 $\mathbf{P}_2$ 、列交換 $\mathbf{Q}_2$ を施したもの（例：行交換 $\mathbf{P}_2$ が第 2、3 行の交換を表せば $\begin{bmatrix} l_{21}' & a_{22}^{(1)'} & a_{23}^{(1)'} & a_{24}^{(1)'} \end{bmatrix}$ と

$\begin{bmatrix} l_{31}' & a_{32}^{(1)'} & a_{33}^{(1)'} & a_{34}^{(1)'} \end{bmatrix}$ を交換する）

$\rightarrow$ 以下継続

LDU 分解は $\mathbf{A}$ の最終形から読み取れる。順列行列 $\mathbf{P}, \mathbf{Q}$ は行交換、列交換の歴史を蓄積している配列から読み取れる。実際、それぞれの最終形を $(i_1, i_2, i_3), (j_1, j_2, j_3, j_4)$ とすれば

$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} \mathbf{e}_{i_1}{}^T \\ \mathbf{e}_{i_2}{}^T \\ \mathbf{e}_{i_3}{}^T \end{bmatrix}$ （3 x 3 行列）、$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \mathbf{e}_{j_1}, \mathbf{e}_{j_2}, \mathbf{e}_{j_3}, \mathbf{e}_{j_4} \end{bmatrix}$ （4 x 4 行列）

となる。

最終的に得られる LDU 分解は行列 $(\mathbf{P}_2\mathbf{P}_1)\mathbf{A}(\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2\mathbf{Q}_3)$ に通常のガウスの消去法を直接適用して得られる結果と一致する筈である。ただ、この行列の表す、行および列の並び替えを消去演算に先立って行うことはできない。上で説明した導出法は、単なる存在定理ではなく、構成的な手続きである点が値打ちである。

最後に注意事項を一つ：これまでの「軸成分選択→行交換→消去演算→・・・」という、

行／列交換付きガウスの消去法を $\mathbf{A}^T$ に適用すれば、$\mathbf{A}$ に対してガウスの消去法を「軸成分選択→列交換→消去演算→・・・」のように列単位に行ったものと同じになる。また、LDU 分解 $\mathbf{PAQ}=\mathbf{LDU}$ の転置形 $\mathbf{Q}^T\mathbf{A}^T\mathbf{P}^T=\mathbf{U}^T\mathbf{D}^T\mathbf{L}^T$ は $\mathbf{Q}^T\mathbf{A}^T\mathbf{P}^T$ の LDU 分解となっている。

4.5　階数の一意性

本節では、与えられた行列の階数は一意的に定まることを証明する。しよう。それにはレッスン 2 で証明した「線形代数の基本定理」を使う：$\mathbf{A}\in\mathbf{R}^{m\times n}$（または $\mathbf{A}\in\mathbf{C}^{m\times n}$）かつ $m<n$ なら、行列方程式 $\mathbf{Ax}=\mathbf{0}$ は必ず非零解 $\mathbf{x}\in\mathbf{R}^{n\times 1}$（または $\mathbf{x}\in\mathbf{C}^{n\times 1}$）をもつ。いいかえると、方程式数が未知数の総数より厳密に少ない同次連立一次方程式は必ず非零解をもつ。

$m=4, n=5$ の場合を例にとる。そこで

(1)　$$\mathbf{A}=\mathbf{P}_1\begin{bmatrix}1&0&0&0&0\\0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\end{bmatrix}\mathbf{Q}_1\equiv\mathbf{P}_1\mathbf{D}_1\mathbf{Q}_1=\mathbf{P}_2\begin{bmatrix}1&0&0&0&0\\0&1&0&0&0\\0&0&1&0&0\\0&0&0&0&0\end{bmatrix}\mathbf{Q}_2\equiv\mathbf{P}_2\mathbf{D}_2\mathbf{Q}_2$$

のように、異なる標準形をもつ同値分解を仮定すれば矛盾が起こることを示そう。まず上式を

(2)　$$\mathbf{D}_1(\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2^{-1})=(\mathbf{P}_1^{-1}\mathbf{P}_2)\mathbf{D}_2\equiv\mathbf{M}$$

と変形すると、$\mathbf{D}_1,\mathbf{D}_2$ の形から $\mathbf{M}$ の形は（x は一般にゼロではない数を表す）

(3)　$$\mathbf{M}=\mathbf{D}_1(\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2^{-1})=\begin{bmatrix}x&x&x&x&x\\x&x&x&x&x\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\end{bmatrix}、\mathbf{M}=(\mathbf{P}_1^{-1}\mathbf{P}_2)\mathbf{D}_2=\begin{bmatrix}x&x&x&0&0\\x&x&x&0&0\\x&x&x&0&0\\x&x&x&0&0\end{bmatrix}$$

ゆえに、$\mathbf{M}$ の形は

(4)　$$\mathbf{M}=\begin{bmatrix}x&x&x&0&0\\x&x&x&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\end{bmatrix}$$

でなければならない。ここで左上 2×3 行列に「線形代数の基本定理」を適用すると

(5)　$$\mathbf{0}=\mathbf{M}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\x_3\\0\\0\end{bmatrix}\equiv\mathbf{Mx}$$

を満たす、すべては 0 でない数 x_1,x_2,x_3 が存在するはずである。ところが(4)後半の式から $\mathbf{Mx}$

を再計算してみると

(6)　$\mathbf{Mx} = (\mathbf{P}_1^{-1}\mathbf{P}_2)\mathbf{D}_2\mathbf{x} = (\mathbf{P}_1^{-1}\mathbf{P}_2)\mathbf{x}$（$\because$ $\mathbf{D}_2$ と $\mathbf{x}$ の形から　$\mathbf{D}_2\mathbf{x} = \mathbf{x}$）

$\neq \mathbf{0}$（$\because$ $\mathbf{P}_1^{-1}\mathbf{P}_2$ は可逆行列、そして $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$）

これは(6)式と矛盾する。以上の証明法の一般の場合への拡張はラーナーにお任せする。■

4.6　LDU 分解の一意性

本節では LDU 分解の一意性の証明を行う。すなわち

(1)　$\mathbf{0} \neq \mathbf{PAQ} = \mathbf{LDU} = \mathbf{L}'\mathbf{D}'\mathbf{U}' \Rightarrow \mathbf{L} = \mathbf{L}',\ \mathbf{D} = \mathbf{D}',\ \mathbf{U} = \mathbf{U}'$

を示そう。ここに $\mathbf{P}, \mathbf{Q}$ はそれぞれ m 次、n 次順列行列を表し、$\mathbf{L}, \cdots$ の形は

(2)　$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_{11} & \mathbf{0} \\ \mathbf{L}_{21} & \mathbf{I}_{m-r} \end{bmatrix} : m \times m$、$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \mathbf{D}_{11} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} : m \times n$、$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \mathbf{U}_{11} & \mathbf{U}_{12} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_{n-r} \end{bmatrix} : n \times n$、

$\mathbf{L}_{11} = \begin{bmatrix} 1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ l_{r1} & & 1 \end{bmatrix} : r \times r$、$\mathbf{D}_{11} = \begin{bmatrix} d_1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & d_r \end{bmatrix} : r \times r$　$(d_1, \cdots, d_r \neq 0)$、$\mathbf{U}_{11} = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & u_{1r} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & 1 \end{bmatrix} : r \times r$

$\mathbf{L}', \mathbf{D}', \mathbf{U}'$ も形は、それぞれ、$\mathbf{L}, \mathbf{D}, \mathbf{U}$ と同じである（成分に“'”を付す)。

まず、与えられた関係 $\mathbf{LDU} = \mathbf{L}'\mathbf{D}'\mathbf{U}'$ を展開すると、

(3)　$\begin{bmatrix} \mathbf{L}_{11}\mathbf{D}_{11}\mathbf{U}_{11} & \mathbf{L}_{11}\mathbf{D}_{11}\mathbf{U}_{12} \\ \mathbf{L}_{21}\mathbf{D}_{11}\mathbf{U}_{11} & \mathbf{L}_{21}\mathbf{D}_{11} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{L}'_{11}\mathbf{D}'_{11}\mathbf{U}'_{11} & \mathbf{L}'_{11}\mathbf{D}'_{11}\mathbf{U}'_{12} \\ \mathbf{L}'_{21}\mathbf{D}'_{11}\mathbf{U}'_{11} & \mathbf{L}'_{21}\mathbf{D}'_{11} \end{bmatrix}$

第(1,1)ブロックの相等

(4)　$\mathbf{L}_{11}\mathbf{D}_{11}\mathbf{U}_{11} = \mathbf{L}'_{11}\mathbf{D}'_{11}\mathbf{U}'_{11}$

を考える。変形して

(5)　$(\mathbf{D}'_{11})^{-1}(\mathbf{L}'_{11})^{-1}\mathbf{L}_{11}\mathbf{D}_{11} = \mathbf{U}'_{11}\mathbf{U}_{11}^{-1}$

ここに、左辺は下三角行列、右辺は単位上三角行列を表す（$\because$ 下三角行列の逆行列は下三角行列であり、その逆行列の対角成分は元の行列の対応する対角成分の逆数に等しい、上三角行列についても同様)。ゆえに上式の各辺はともに（r 次）単位行列に等しい。すなわち

(6)　$(\mathbf{D}'_{11})^{-1}(\mathbf{L}'_{11})^{-1}\mathbf{L}_{11}\mathbf{D}_{11} = \mathbf{I}$、$\mathbf{U}'_{11}\mathbf{U}_{11}^{-1} = \mathbf{I}$

後者より

(7)　$\mathbf{U}_{11} = \mathbf{U}'_{11}$

また前者を変形し、

(8)　$(\mathbf{L}'_{11})^{-1}\mathbf{L}_{11} = \mathbf{D}'_{11}\mathbf{D}_{11}{}^{-1}$

とすれば、左辺は単位下三角行列、右辺は対角行列を表すから、両者はともに単位行列に等しい。すなわち、

(9)　$(\mathbf{L}'_{11})^{-1}\mathbf{L}_{11} = \mathbf{I}$、　$\mathbf{D}'_{11}\mathbf{D}_{11}{}^{-1} = \mathbf{I}$

これより

(10)　$\mathbf{L}_{11} = \mathbf{L}'_{11}$、　$\mathbf{D}_{11} = \mathbf{D}'_{11}$

が得られる。以上の結果を(3)式に使うと、

(11)　$\mathbf{L}_{21} = \mathbf{L}'_{21}$、$\mathbf{U}_{12} = \mathbf{U}'_{12}$

が得られる。以上で(1)が証明された。■

最後にひとこと：本レッスンでは行／列交換つきガウスの消去法による同値分解と LDU 分解の導出法を示した。導出にはかなりの手間を要したが、分解定理自身ののべているところは簡明直裁である。数学の世界では導出には手がかかるが、結果は簡明であるような事実ほど応用価値が高いものである。次のレッスンで示すように、同値分解／LDU 分解から線形代数における基本的な事実が従う。

腕試し問題

問題 4.1　$\mathbf{D}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$、$\mathbf{D}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$なら、どんな 4 次可逆行列 $\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2$、5 次可逆行列 $\mathbf{Q}_1, \mathbf{Q}_2$ をとっても $\mathbf{P}_1\mathbf{D}_1\mathbf{Q}_1 = \mathbf{P}_2\mathbf{D}_2\mathbf{Q}_2$ は成立しないことを示せ。

（略証：結論を否定し、$\mathbf{D}_1\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_2{}^{-1} = \mathbf{P}_1{}^{-1}\mathbf{P}_2\mathbf{D}_2 \equiv \mathbf{M}$ とすれば、この行列の形は$\begin{bmatrix} \mathbf{M}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}$である

ことがわかる。ここに、$\mathbf{M}_1$ は 3×4 行列を表す。すると、$\mathbf{M}_1\mathbf{x} = \mathbf{0}$ を満たす $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ がとれる。

そして、$\mathbf{M}\begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{M}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{M}_1\mathbf{x} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} = \mathbf{0}$。他方、$\mathbf{M}\begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} = \mathbf{P}_1{}^{-1}\mathbf{P}_2\mathbf{D}_2\begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} = \mathbf{P}_1{}^{-1}\mathbf{P}_2\begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \neq \mathbf{0}$

（$\because \mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2$ は可逆行列）。これは矛盾である。■）

問題 4.2　LDU 分解の数値例　与えられた 3×4 行列 $\mathbf{A}=\begin{bmatrix} 0 & 0.1 & 0.2 & 0 \\ 0.4 & 0.2 & 0.8 & 2 \\ 0.2 & 0.6 & 1.4 & 1 \end{bmatrix}$

の LDU 分解を、行および列交換付きガウスの消去法を使って計算せよ。ただし、軸成分はその段階における絶対値最大の成分を選ぶものとする。

（答：$\mathbf{PAQ}=\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 0.1 & 0.2 & 0 \\ 0.4 & 0.2 & 0.8 & 2 \\ 0.2 & 0.6 & 1.4 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$

$=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.5 & 1 & 0 \\ 0 & 0.2 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0.4 & 0.1 & 0.2 \\ 0 & 1 & 0.5 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}=\mathbf{LDU}=\begin{bmatrix} 2 & 0.8 & 0.2 & 0.4 \\ 1 & 1.4 & 0.6 & 0.2 \\ 0 & 0.2 & 0.1 & 0 \end{bmatrix}$ ■）

問題 4.3 （前問の続き）

$$\begin{bmatrix} 2 & 0.8 & 0.2 & 0.4 \\ 1 & 1.4 & 0.6 & 0.2 \\ 0 & 0.2 & 0.1 & 0 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} d_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d_3 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & 1 & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & 1 & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

を各未知数について解き、前問の LDU 分解形が再生せよ。
（略解：u_{34} は全く任意でよく、これ以外の未知成分は一意的に定まる。$u_{34}=0$ ととれば前問の LDU 分解形が得られる。■）

問題 4.4 この問題では LDU 分解から逆にガウスの消去法を出してみよう。簡単な例として、3 x 4 行列 **A** の LDU 分解

$$(1)\quad \mathbf{A}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} d_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & 1 & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\equiv\mathbf{LDU}\quad (d_1, d_2\neq 0)$$

を考える。これは LDU 分解の一般公式において順列行列 $\mathbf{P}$、$\mathbf{Q}$ がともに単位行列、**A** の階数が 2 である場合を表す。右辺の乗算を実行し、両辺の対応する成分を等置すれば、右辺の各成分が一意的に求まって行くことを見ることができるが（$d_1=a_{11},\cdots$）、このやり方ではガウスの消去法は見えてこない。

まず、$\mathbf{L}$ は因数分解形

(2) $$\mathbf{L}=\begin{bmatrix}1&0&0\\l_{21}&1&0\\l_{31}&l_{32}&1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0&0\\l_{21}&1&0\\l_{31}&0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&l_{32}&1\end{bmatrix}$$

に書けることを示せ。つぎに、逆行列の公式

(3) $$\begin{bmatrix}1&0&0\\l_{21}&1&0\\l_{31}&0&1\end{bmatrix}^{-1}=\begin{bmatrix}1&0&0\\-l_{21}&1&0\\-l_{31}&0&1\end{bmatrix}\equiv\mathbf{L}_1 \qquad \begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&l_{32}&1\end{bmatrix}^{-1}=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&-l_{32}&1\end{bmatrix}\equiv\mathbf{L}_2$$

が成り立つことを検算せよ。(2)(3)を使って(1)を

(3) $\mathbf{L}_2(\mathbf{L}_1\mathbf{A})=\mathbf{DU}$

と変形すれば、左辺はガウスの消去法を表すことを示せ。

（略証：

$$\mathbf{L}_1\mathbf{A}=\begin{bmatrix}1&0&0\\-l_{21}&1&0\\-l_{31}&0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_{11}&a_{12}&a_{13}&a_{14}\\a_{21}&a_{22}&a_{23}&a_{24}\\a_{31}&a_{32}&a_{33}&a_{34}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&l_{32}&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}d_1&0&0&0\\0&d_2&0&0\\0&0&0&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&u_{12}&u_{13}&u_{14}\\0&1&u_{23}&u_{24}\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{bmatrix}$$

各辺を計算すると

$$\text{左辺}=\begin{bmatrix}a_{11}&a_{12}&a_{13}&a_{14}\\a_{21}-l_{21}a_{11}&a_{22}-l_{21}a_{12}&a_{23}-l_{21}a_{13}&a_{24}-l_{21}a_{14}\\a_{31}-l_{31}a_{11}&a_{32}-l_{31}a_{11}&a_{33}-l_{31}a_{11}&a_{34}-l_{31}a_{11}\end{bmatrix}$$

＝$\mathbf{A}$ の第 i 行を（第 i 行）$-\,l_{i1}$（第 1 行）で置き換えた行列、$i=2,3$

$$\equiv\begin{bmatrix}a_{11}&a_{12}&a_{13}&a_{14}\\a_{21}^{(1)}&a_{22}^{(1)}&a_{23}^{(1)}&a_{24}^{(1)}\\a_{31}^{(1)}&a_{32}^{(1)}&a_{33}^{(1)}&a_{34}^{(1)}\end{bmatrix}\equiv\mathbf{A}^{(1)}$$

$$\text{右辺}=\begin{bmatrix}d_1&x&x&x\\0&d_2&x&x\\0&x&x&x\end{bmatrix}$$ （”x”は一般に非零成分を表す）

上の 2 式を比較すると、

(1,1)成分：$a_{11}=d_1\neq 0$、(2,2)成分：$a_{22}^{(1)}=d_2\neq 0$、(2,1)(3,1)成分：$a_{21}^{(1)}=a_{31}^{(1)}=0$

ゆえに、左辺の演算は、**A** の第 1 行の適当なスカラー倍（すなわち $l_{i1} = a_{i1} / a_{11}$ 倍、$a_{11} \neq 0$）を第 i 行から引いてその先頭成分をゼロ化する演算、であることがわかる（$i = 2,3$）。これはガウスの消去法の第 1 段に他ならない。以下同様のやり方で進めばよい。■）